Bevis for $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$:

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \tilde{A}^2 \rangle$$

og tilsvarende $(\Delta B)^2 = \dots = \langle \tilde{B}^2 \rangle$. Dvs

$\tilde{A} = \hat{A} - \langle A \rangle$ og $\tilde{B} = \hat{B} - \langle B \rangle$ er operatorer for avvik fra forventningsverdiene.

Starter med $\int \left| \tilde{A} \Psi + i\alpha \tilde{B} \Psi \right|^2 dx \geq 0$,

inntil videre med vilkårlig reell α.

Siden A, B, $\langle A \rangle$ og $\langle B \rangle$ er <u>reelle</u>, er samtlige operatorer $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\tilde{A}$, $\tilde{B}$ <u>hermiteske</u>. Da kan

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 \, dx = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* dx \qquad \text{(PCH 2.8)}$$

benyttes etter behov.

$$\int \{ \tilde{A} \Psi + i\alpha \tilde{B} \Psi \}^* \{ \tilde{A} \Psi + i\alpha \tilde{B} \Psi \} \, dx$$

$$= \int (\tilde{A} \Psi)^* \tilde{A} \Psi \, dx + \alpha^2 \int (\tilde{B} \Psi)^* \tilde{B} \Psi \, dx$$

$$+ i\alpha \int (\tilde{A} \Psi)^* \tilde{B} \Psi \, dx - i\alpha \int (\tilde{B} \Psi)^* \tilde{A} \Psi \, dx$$

$$= \langle \tilde{A}^2 \rangle + \alpha^2 \langle \tilde{B}^2 \rangle + i\alpha \langle \tilde{A} \tilde{B} - \tilde{B} \tilde{A} \rangle$$

$$= (\Delta A)^2 + \alpha^2 (\Delta B)^2 + i\alpha \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle \geq 0$$

$$[\tilde{A}, \tilde{B}] = (\hat{A} - \langle A\rangle)(\hat{B} - \langle B\rangle) - (\hat{B} - \langle B\rangle)(\hat{A} - \langle A\rangle)$$

$$= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \underbrace{- \hat{A}\langle B\rangle + \langle B\rangle\hat{A}}_{=0} \underbrace{- \langle A\rangle\hat{B} + \hat{B}\langle A\rangle}_{=0}$$

$$\underbrace{+ \langle A\rangle\langle B\rangle - \langle B\rangle\langle A\rangle}_{=0}$$

$$= [\hat{A}, \hat{B}]$$

$$\Rightarrow \quad (\Delta A)^2 + \alpha^2 (\Delta B)^2 + i\alpha \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \geq 0$$

$$\Rightarrow \quad (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq -\alpha^2 (\Delta B)^4 - \alpha i \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle (\Delta B)^2$$

Ulikheten gjelder generelt, også for $\alpha = -\frac{i}{2(\Delta B)^2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$ som gir maksimal høyre side. Innsetting av denne α gir

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq -\frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2$$ (som er positiv, da $[\hat{A}, \hat{B}]$ er imaginær)

$$\Rightarrow \quad \Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$$ (qed)

Eks 1: $[x, \hat{p}_x] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

En partikkel kan ikke ha skarp x og p_x samtidig

Eks 2: $[y, \hat{p}_z] = 0$

En partikkel kan ha skarp y og p_z samtidig

Eks 3: Hva slags $\Psi(x)$ gir minimal $\Delta x \cdot \Delta p_x = \hbar/2$?

Løsn: Må tilsvare $\tilde{A}\Psi + i\alpha\,\tilde{B}\Psi = 0$, med

$\tilde{A} = x - \langle x\rangle$, $\tilde{B} = \hat{p} - \langle p\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \langle p\rangle$ og

$$\alpha = -\frac{i}{2(\Delta p)^2}\langle[x,\hat{p}]\rangle = \frac{\hbar}{2(\Delta p)^2} = \frac{\Delta x\,\Delta p}{(\Delta p)^2} = \frac{\Delta x}{\Delta p}$$

Dermed:

$$(x - \langle x\rangle)\Psi + \left(\alpha\hbar\frac{d}{dx} - i\alpha\langle p\rangle\right)\Psi = 0$$

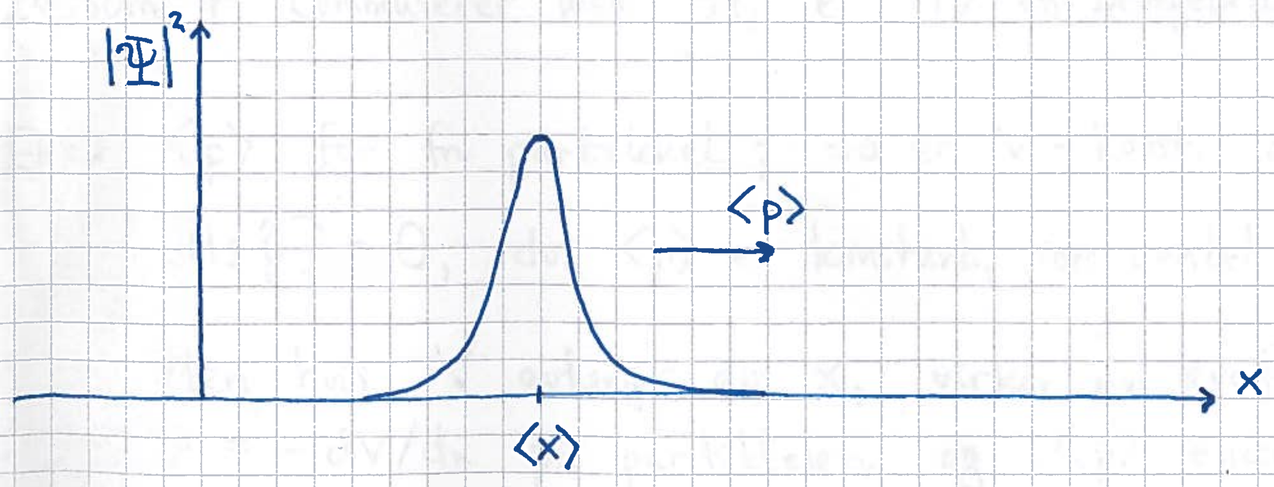
$$\Rightarrow \quad \frac{d\Psi}{\Psi} = \left(-\frac{x-\langle x\rangle}{\alpha\hbar} + \frac{i\langle p\rangle}{\hbar}\right)dx$$

$$\Rightarrow \quad \Psi(x) = C\cdot\exp\left\{-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{2\alpha\hbar} + \frac{i\langle p\rangle x}{\hbar}\right\}$$

der $2\alpha\hbar = 2\cdot\frac{\Delta x}{\Delta p}\cdot 2\Delta x\Delta p = (2\Delta x)^2$ slik at

$$\Psi(x) = C\cdot\exp\left\{-\left(\frac{x-\langle x\rangle}{2\Delta x}\right)^2 + \frac{i\langle p\rangle x}{\hbar}\right\}$$

dvs en gaussformet ("gaussisk") bølgepakke med tyngdepunkt i $x = \langle x\rangle$ og med bredde Δx :



Forventningsverdienes tidsutvikling

[PCH 4.3 ; DJG 3.4.3 ; IØ 4.3]

Vi bruker def. av $\langle F\rangle$, samt SL:

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{d}{dt}\left\{\int \Psi^* \hat{F}\,\Psi\,dx\right\}$$

$$= \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\hat{F}\,\Psi\,dx + \int \Psi^* \hat{F}\frac{\partial \Psi}{\partial t}dx + \int \Psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}\Psi\,dx$$

$$= \int \left(\frac{\hat{H}\Psi}{i\hbar}\right)^* \hat{F}\,\Psi\,dx + \int \Psi^* \hat{F}\,\frac{\hat{H}\Psi}{i\hbar}dx + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}\right\rangle$$

$$\stackrel{(\text{PCH } 2.7)}{=} \int \frac{i}{\hbar}\Psi^* \hat{H}\hat{F}\,\Psi\,dx - \int \frac{i}{\hbar}\Psi^* \hat{F}\hat{H}\,\Psi\,dx + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}\right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left\langle [\hat{H},\hat{F}]\right\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t}\right\rangle$$

Ofte (alltid i TFY4215) er $\hat{F}$ ikke eksplisitt avh. av t, dvs $\partial\hat{F}/\partial t = 0$. Da er

$$\boxed{\frac{d\langle F\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle [\hat{H},\hat{F}]\right\rangle}$$

Dersom $\hat{F}$ kommuterer med $\hat{H}$, er $\langle F\rangle$ en bevegelseskonstant.

Eks: $\langle p\rangle$ for fri partikkel; da er V = konst. og $[\hat{H},\hat{p}] = 0$, dvs $\langle p\rangle$ er konstant, som ventet.

Men hvis V avhenger av x, virker en kraft $F = -dV/dx$ på partikkelen, og $\langle p\rangle$ endrer seg med tiden t. Og nå er $[\hat{H},\hat{p}] = [V,\hat{p}] \neq 0$.

Ehrenfests teorem

[PCH 4.4 ; DJG 1.5, 4.1 ; IØ 4.4]

Knytter QM til Newtons 2. lov og viser at forventningsverdier $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$ oppfyller klassiske bevegelsesligninger:

$$\boxed{\begin{array}{lll} \text{1D}: & \frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m} \; ; & \frac{d}{dt}\langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \\ \text{3D}: & \frac{d}{dt}\langle \vec{r} \rangle = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m} \; ; & \frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = \langle -\nabla V \rangle \end{array}}$$

La oss bevise dette i 1D:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, x] \rangle = \frac{i}{2m\hbar}\langle [\hat{p}^2, x] \rangle \qquad (\text{da } [V, x] = 0)$$

$$[\hat{p}^2, x] = \hat{p}\hat{p}x - x\hat{p}\hat{p} = \hat{p}\hat{p}x - \hat{p}x\hat{p} + \hat{p}x\hat{p} - x\hat{p}\hat{p}$$

$$= \hat{p}[\hat{p}, x] + [\hat{p}, x]\hat{p} = -2i\hbar\,\hat{p}$$

$$\Rightarrow d\langle x \rangle/dt = \langle \hat{p} \rangle / m = \langle p \rangle / m$$

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [V, \hat{p}] \rangle \qquad (\text{da } [\hat{p}^2, \hat{p}] = 0)$$

$$[V, \hat{p}]f(x) = V\frac{\hbar}{i}\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(Vf) = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x}f(x)$$

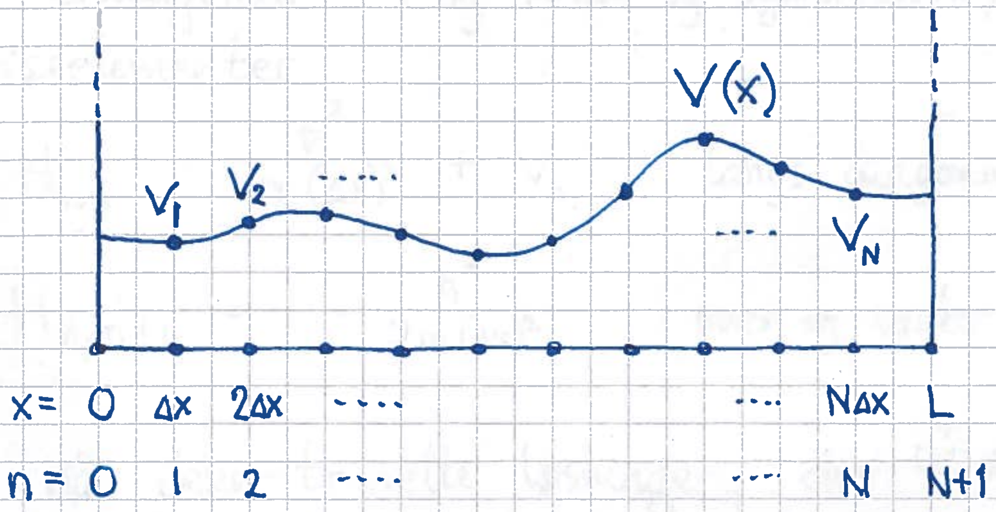
$$\Rightarrow d\langle p \rangle/dt = -\langle \partial V/\partial x \rangle \qquad (\text{som er Newtons 2. lov}) \qquad (\text{qed})$$

Innsetting av $\langle p \rangle = m\, d\langle x \rangle/dt$ i $d\langle p \rangle/dt = \langle -\partial V/\partial x \rangle = \langle F \rangle$ gir $m\, d^2\langle x \rangle/dt^2 = \langle F \rangle$. [Men merk at generelt er $\langle F(x) \rangle \neq F(\langle x \rangle)$; se PCH 4.4]

Numerisk løsning av TUSL i 1D

Ønsker å løse TUSL med vilkårlig potensial $V(x)$ mellom $x = 0$ og $x = L$. Vi setter $V = \infty$ for $x \leq 0$ og $x \geq L$.

Området $0 < x < L$ diskretiseres, dvs deles opp i $N+1$ små intervaller med bredde $\Delta x = L/(N+1)$:



$$\Rightarrow \quad x_n = n \cdot \Delta x, \quad V_n = V(x_n) \quad ; \quad n = 0, 1, \dots, N, N+1$$

der vi setter $V_0 = V_{N+1} = \infty$

$$\text{TUSL:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\psi_n = \psi(x_n) \quad ; \quad \psi_0 = \psi_{N+1} = 0$$

ψ'' tilnærmes med endelige differanser:

$$\psi''(x_n) = \psi_n'' \approx \frac{\psi'_{n+1/2} - \psi'_{n-1/2}}{\Delta x} \approx \frac{\frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta x} - \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta x}}{\Delta x}$$

$$= \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{(\Delta x)^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}\left\{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}\right\} + V_n\psi_n = E\psi_n$$

$$n = 1, 2, \dots, N$$

Dvs N ligninger for de N ukjente $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$.
Kan skrives på matriseform

$$\mathbb{H}\vec{\psi} = E\vec{\psi}$$

med tridiagonal (og reell og symmetrisk) $\mathbb{H}$ med matriseelementer

$$H_{nn} = \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + V_n \quad \text{langs diagonalen}$$

$$H_{n,n\pm 1} = -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \quad \text{over og under diagonalen}$$

Har nå ikke-trivielle løsninger, dvs $\vec{\psi} \neq 0$, dersom

$$\det\left\{\mathbb{H} - E\mathbb{1}\right\} = 0$$

som gir en N.gradsligning

$$c_N E^N + c_{N-1}E^{N-1} + \dots + c_1 E + c_0 = 0$$

med N løsninger $E_1, E_2, \dots, E_N$ og
tilhørende egenvektorer $\vec{\psi}^{(1)}, \vec{\psi}^{(2)}, \dots, \vec{\psi}^{(N)}$
som bestemmes ved å løse

$$(\mathbb{H} - E_j\mathbb{1})\vec{\psi}^{(j)} = 0 \quad ; \quad j = 1, 2, \dots, N$$

Normering: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi^{(j)}(x)|^2 dx \longrightarrow \sum_{n=1}^{N} |\psi_n^{(j)}|^2 \Delta x = 1 \quad ; \quad j = 1, 2, \dots, N$

der $\psi_n^{(j)} = \psi^{(j)}(x_n)$ = verdien av $\psi^{(j)}$ i posisjon $x_n = n \cdot \Delta x$.

Løses i python med f.eks. eigh_tridiagonal fra scipy.

Med N punkter x_n fås N ortonormerte egenfunksjoner $\psi^{(j)}(x)$, i python normert slik at

$$\sum_{n=1}^{N} \psi_n^{(j)} \cdot \psi_n^{(k)} = \delta_{jk} \qquad (\text{uten } \Delta x)$$

Disse utgjør et såkalt fullstendig sett, som vi f.eks kan utvikle en vilkårlig starttilstand i:

$$\Psi(x,0) = \sum_{j=1}^{N} c^{(j)} \psi^{(j)}(x)$$

Som på s. 37 fastlegges utviklingskoeffisientene:

$$\Psi_k = \sum_j c^{(j)} \psi_k^{(j)} \quad ; \quad \Psi_k = \Psi(x_k, 0), \quad \psi_k^{(j)} = \psi^{(j)}(x_k)$$

$$\Rightarrow \sum_k \psi_k^{(i)} \Psi_k = \sum_j c^{(j)} \sum_k \psi_k^{(i)} \psi_k^{(j)} = \sum_j c^{(j)} \delta_{ij} = c^{(i)}$$

Vi setter $c^{(j)}$ tilbake i utviklingen av Ψ_k:

$$\Psi_k = \sum_j \sum_\ell \psi_\ell^{(j)} \Psi_\ell \psi_k^{(j)}$$

$$= \sum_\ell \Psi_\ell \sum_j \psi_\ell^{(j)} \psi_k^{(j)}$$

som for vilkårlig Ψ_k bare kan være oppfylt dersom

$$\sum_j \psi_\ell^{(j)} \psi_k^{(j)} = \delta_{\ell k}$$

som kalles fullstendighetsrelasjonen for funksjonssettet $\{\psi^{(j)}\}$. (Se PCH 2.4.1)

[Merk: Har ovenfor antatt at $\psi^{(j)}$ er reelle.]

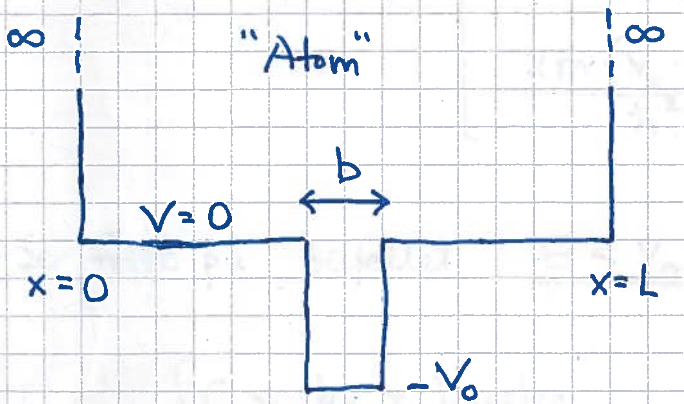
Med $\{c^{(j)}\}$ på plass kan vi studere tidsutviklingen

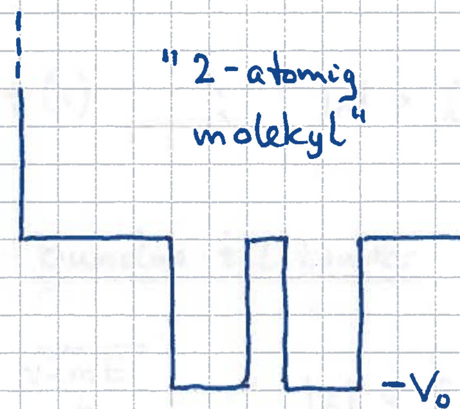
$$\Psi(x_k,t) = \Psi_k(t) = \sum_j c^{(j)}\, \psi_k^{(j)}\, \exp(-iE_j t/\hbar)$$

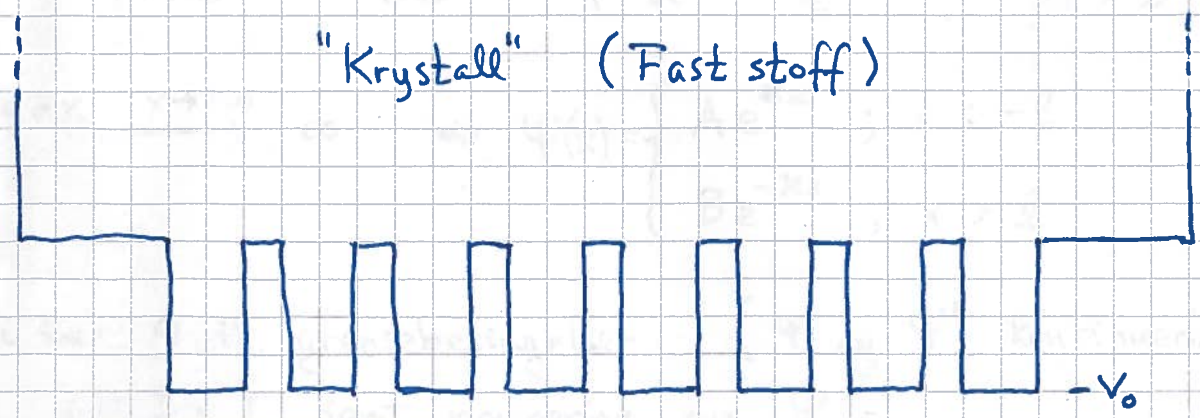
og vi kan beregne forventningsverdier $\langle x\rangle(t)$ og $\langle p\rangle(t)$ i henhold til postulat C_1 og sannsynlighetsstrøm $j(x_k,t)$ som på s. 42 ; osv.

Obligatorisk øving / Fysikkprosjekt i TMA4320 :

Numerisk løsning av endimensjonale modeller for atom, molekyl og krystall.

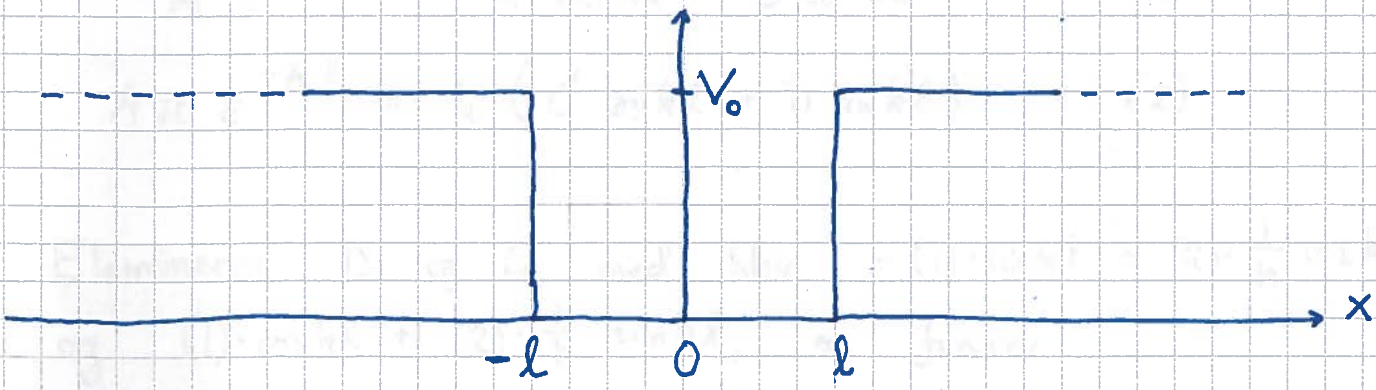






Dvs: Stykkevis konstante potensialer. En eller flere endelige potensialbrønner.

Endelig potensialbrønn [PCH 3.3; DJG 2.6; IØ 3.2]



dvs $V(x) = \begin{cases} 0 & ; \ |x| < \ell \\ V_0 & ; \ |x| > \ell \end{cases}$

TUSL: $\psi''(x) = \begin{cases} -\dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) & ; \ |x| < \ell \\ \dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x) & ; \ |x| > \ell \end{cases}$

Ser først på tilfellet $\underline{E < V_0}$; bundne tilstander :

$$\psi(x) = \begin{cases} C \sin kx + D \cos kx & ; \ k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} & ; \ |x| < \ell \\ A e^{\varkappa x} + B e^{-\varkappa x} & ; \ \varkappa = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} & ; \ |x| > \ell \end{cases}$$

$$e^{\pm \varkappa x} \xrightarrow{x \to \pm\infty} \infty \Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} A e^{\varkappa x} & ; \ x < -\ell \\ B e^{-\varkappa x} & ; \ x > \ell \end{cases}$$

Vi har 4 stk. grensebetingelser (ψ og ψ' kontinuerlige i $x = \pm \ell$) samt normering av ψ

$\Rightarrow$ Kan fastlegge koeffisientene A, B, C, D og energien E.

Symmetrisk $V(x)$ $\Rightarrow$ Symm. $|\psi|^2$ $\Rightarrow$ Symm. ($D \cos kx$) og antisymm. ($C \sin kx$) løsninger

ψ og ψ' kontinuerlig i $x = -\ell$ $\Rightarrow$

$$A\, e^{-\varkappa \ell} = -C \sin k\ell + D \cos k\ell \qquad (1)$$

$$A \varkappa\, e^{-\varkappa \ell} = k\left(C \cos k\ell + D \sin k\ell\right) \qquad (2)$$

Eliminerer D og C med hhv $-(1)\cdot \sin k\ell + (2)\cdot \frac{1}{k} \cos k\ell$ og $(1)\cdot \cos k\ell + (2)\cdot \frac{1}{k} \sin k\ell$, og finner

$$C = A e^{-\varkappa \ell} \cos k\ell \left(\frac{\varkappa}{k} - \tan k\ell\right) \qquad (3)$$

$$D = A e^{-\varkappa \ell} \cos k\ell \left(1 + \frac{\varkappa}{k} \tan k\ell\right) \qquad (4)$$

ψ og ψ' kontinuerlig i $x = \ell$ $\Rightarrow$

$$B\, e^{-\varkappa \ell} = C \sin k\ell + D \cos k\ell \qquad (5)$$

$$-B\varkappa\, e^{-\varkappa \ell} = k\left(C \cos k\ell - D \sin k\ell\right) \qquad (6)$$

Kombinasjonen $(5)\cdot \varkappa/k + (6)\cdot 1/k$ og divisjon med $\cos k\ell$ gir

$$C\left(\frac{\varkappa}{k} \tan k\ell + 1\right) + D\left(\frac{\varkappa}{k} - \tan k\ell\right) = 0 \qquad (7)$$

hvoretter innsetting av C og D fra hhv (3) og (4) gir

$$2\left(\frac{\varkappa}{k} \tan k\ell + 1\right)\left(\frac{\varkappa}{k} - \tan k\ell\right) = 0$$

Antisymm. (AS) løsninger:

$$\frac{\varkappa}{k} \tan k\ell + 1 = 0 \quad \Rightarrow D = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = C \sin kx$$

Symm. (S) løsninger:

$$\frac{\varkappa}{k} - \tan k\ell = 0 \quad \Rightarrow C = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = D \cos kx$$

Tilhørende energiegenverdier:

$$\tan k\ell = \begin{cases} \dfrac{\varkappa}{k} & (S) \\ -\dfrac{k}{\varkappa} & (AS) \end{cases} \Rightarrow \tan \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{V_0 - E}{E}} & (S) \\ -\sqrt{\dfrac{E}{V_0 - E}} & (AS) \end{cases}$$

Grensen $V_0 \to \infty$ tilsvarer partikkel i boks:

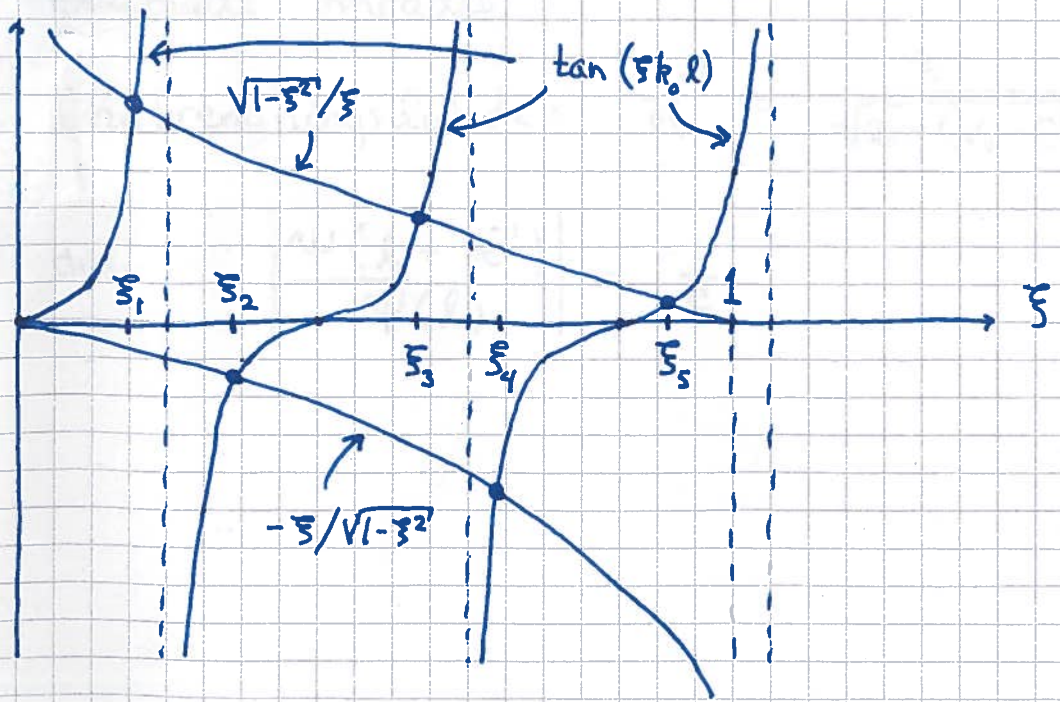
$$\tan \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{cases} \infty & (S) \\ 0 & (AS) \end{cases} \Rightarrow \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \ldots & (S) \\ \pi, 2\pi, \ldots & (AS) \end{cases}$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2m\ell^2}\left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 \underset{=}{\overset{L=2\ell}{=}} \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad (n = 1, 2, 3, \ldots) \quad \text{OK!}$$

Hvor mange bundne løsninger med endelig V_0?

Innfør $\xi = \sqrt{E/V_0}$ $(0 < \xi < 1)$ og $k_0 = \dfrac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$

$$\Rightarrow \tan(\xi \cdot k_0 \ell) = \begin{cases} \sqrt{1-\xi^2}\,/\,\xi & (S) \\ -\xi\,/\sqrt{1-\xi^2} & (AS) \end{cases}$$



- Minst en (symm.) bundet tilstand: $\sqrt{1-\xi^2}/\xi$ må krysse $\tan(\xi k_0 \ell)$ minst en gang.

- Dypere og bredere brønn (dvs økende $k_0 \ell$) gir økende antall bundne tilstander: Da flyttes asymptotene til $\tan(\xi k_0 \ell)$ mot lavere ξ-verdier.

- Hvis $(N-1)\frac{\pi}{2} < k_0 \ell < N\frac{\pi}{2}$, har vi N bundne tilstander. Da er

$$N < \frac{2}{\pi} k_0 \ell + 1 < N+1$$

dvs

$$N = 1 + \text{heltallsverdi av } \frac{2 k_0 \ell}{\pi}$$

$$= 1 + \text{------}\,''\,\text{------}\quad 2\sqrt{2mV_0}\,\ell / \pi\hbar$$

- $\psi(x) \sim \exp(-\varkappa|x|)$ for $|x| > \ell$, dvs $|\psi|^2 > 0$ selv om $E < V_0$, dvs en viss sannsynlighet for at partikkelen befinner seg i det klassisk forbudte området.

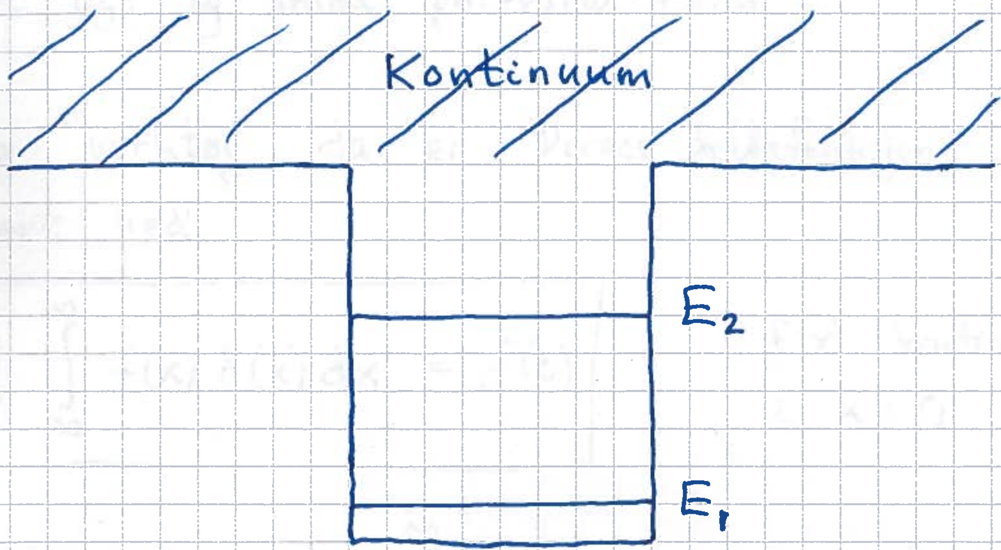
Inntrengningsdybde: $\varkappa^{-1} = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$

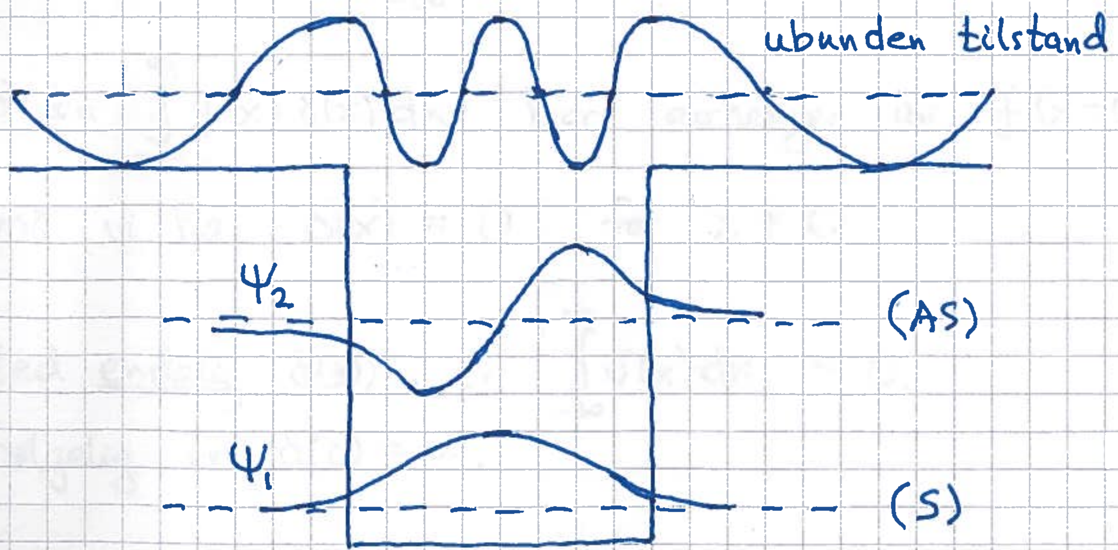
dvs $$\left|\frac{\psi(\ell + \varkappa^{-1})}{\psi(\ell)}\right| = \frac{1}{e}$$

For $E > V_0$ har vi et kontinuum av ubundne tilstander. For $|x| > \ell$ har TUSL nå Løsninger

$$\psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx \;;\; K = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

som kan "matches" (dvs: ψ og ψ' kontinuerlige i $x = \pm\ell$) med $C \sin kx + D \cos kx$ $(k = \sqrt{2mE}/\hbar)$ for alle verdier av $E > V_0$.





Diracs deltafunksjon

[PCH 3.4, App B ; DJG 2.5 ; IØ 3.3, 2.4.f]

Kan i fysikk ha behov for å beskrive størrelser som er sterkt lokalisert, i rom eller tid. Eksempler:

Massetetthet for punktmasse
Ladningstetthet for punktladning
Innbyrdes krefter i kortvarige kollisjoner
Svært dyp og smal potensialbrønn

Nyttig "verktøy" da er Diracs deltafunksjon $\delta(x)$, definert ved

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx = f(0)}$$

$f(x)$ kontinuerlig i $x = 0$

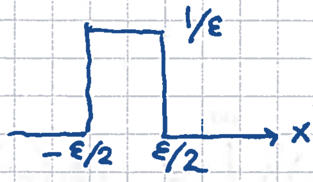
- $f(x) = 1 \implies \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx = 1$

- Siden $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x)\,dx$ bare avhenger av $f(x=0)$ må vi ha $\delta(x) = 0$ for $x \neq 0$

- Med endelig $\delta(0)$ er $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx = 0$.
  Følgelig er $\delta(0) = \infty$.

- $\delta(x)$ er ikke en ordinær funksjon, men kan representeres med ordinære funksjoner

Eks 1 : $\delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} 1/\varepsilon & ; \ |x| \leq \varepsilon/2 \\ 0 & ; \ |x| > \varepsilon/2 \end{cases}$



$$\left.\begin{aligned} &\lim_{\varepsilon\to 0} \delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} \infty & ; \ x = 0 \\ 0 & ; \ x \neq 0 \end{cases} \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\varepsilon(x)\, dx = \frac{1}{\varepsilon}\cdot\varepsilon = 1 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \quad \delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0} \delta_\varepsilon(x)$$

Eks 2 : $\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-1/\varepsilon}^{1/\varepsilon} e^{ikx}\, dk = \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}$

$$\lim_{\substack{x\to 0 \\ \varepsilon\to 0}} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x} = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{x/\varepsilon}{\pi x} = \infty$$

$\frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}$ oscillerer uendelig raskt i grensen $\varepsilon \to 0$, unntatt i $x = 0$

$$\Rightarrow \lim_{\varepsilon\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x} f(x)\, dx = f(0) \underbrace{\lim_{\varepsilon\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}\, dx}_{= 1 \ (\text{uavh. av } \varepsilon)} = f(0)$$

$$\Rightarrow \quad \delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0} \delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\, dk$$

(Fourier-representasjon av $\delta(x)$.)

Flere egenskaper:

- $$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx \;\underset{dy=-dx}{\overset{y=-x}{=\!=}}\; \int_{\infty}^{-\infty} \delta(-y)(-dy) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(-y)\,dy = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(-x)\,dx$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta(-x) = \delta(x)} \qquad \Rightarrow \delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm ikx}\,dk$$

- $$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(ax)\,dx \;\underset{dy=a\,dx}{\overset{y=ax}{=\!=}}\; \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{y}{a}\right)\delta(y)\,\frac{dy}{a} = \frac{f(0)}{a} \qquad (a>0)$$

Med $a<0$: $\displaystyle\int_{\infty}^{-\infty} f\left(\frac{y}{a}\right)\delta(y)\,\frac{dy}{a} = -\frac{f(0)}{a} = \frac{f(0)}{|a|}$

$$\Rightarrow \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(ax)\,dx = \frac{f(0)}{|a|}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}}$$

- Definisjon av $\delta(\vec{r})$ i flere dimensjoner, f.eks. tre:

$$\int f(\vec{r})\,\delta(\vec{r})\,d^3r = f(0)$$

dvs $\delta(\vec{r}) = \infty$ for $x=y=z=0$, og $\delta(\vec{r})=0$ ellers

$$\Rightarrow \boxed{\delta(\vec{r}) = \delta(x)\cdot\delta(y)\cdot\delta(z)}$$

- Enhet: $\displaystyle\int \delta(x)\,dx = 1 \Rightarrow [\delta(x)] = \frac{1}{[x]}$

$$\int \delta(\vec{r})\,d^3r = 1 \Rightarrow [\delta(\vec{r})] = \frac{1}{[r]}$$

Eks 1: Punktladning q i posisjon $\vec{a}$

$$\rho(\vec{r}) = q \cdot \delta(\vec{r}-a) \; ; \quad [\rho] = C \cdot m^{-3} \, , \text{ OK}$$

Eks 2: Kraft fra vegg på ball som treffer veggen ved tidspunkt t_0

$F(t) = p \cdot \delta(t-t_0)$; p = ballens impuls-endring i kollisjonen ; $[p] = N \cdot s = kg\, m/s$, OK

Normering med δ-funksjonen

Med Eks 2 s. 62 kan vi nå normere plane bølger

$$\psi_p(x) = C\, e^{ipx/\hbar}$$

som er egenfunksjoner til $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\, \psi_{p'}(x)\, dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar}\, dx$$

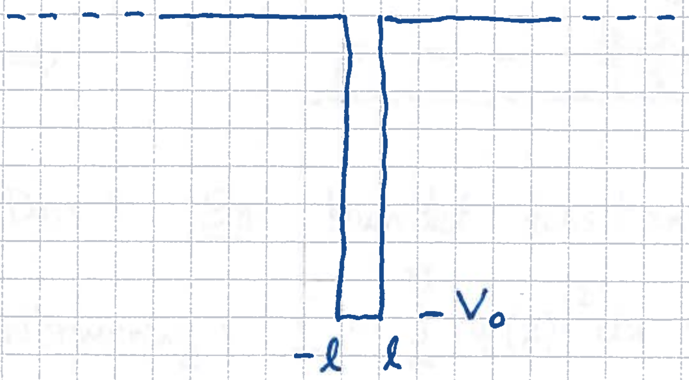
$$= |C|^2 \hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)y}\, dy$$

$$= |C|^2 \hbar \cdot 2\pi\, \delta(p'-p)$$

Med $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$, dvs $\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$, har vi δ-funksjonsnormering i den kontinuerlige delen av energispekteret (ubundne tilstander):

$$\langle \psi_p, \psi_{p'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\, \psi_{p'}(x)\, dx = \delta(p'-p) = \delta(p-p')$$

Deltafunksjonsbrønn



$V_0 \to \infty$

$\ell \to 0$

$\beta = 2V_0 \ell$ endelig

$V(x) = -\beta\, \delta(x)$

Bundet tilstand, $E < 0$:

For $x \neq 0$ er $V(x) = 0$

$$\Rightarrow \quad \psi'' - \kappa^2 \psi = 0 \; ; \quad \kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \quad \psi(x) = \begin{cases} C\, e^{-\kappa x} & ; \; x > 0 \\ C\, e^{\kappa x} & ; \; x < 0 \end{cases} \quad \text{og} \quad \psi(0) = C$$

Finner E ved å integrere TUSL fra $-\varepsilon$ til ε og la $\varepsilon \to 0$ til slutt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x)\psi = E\psi$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d}{dx}\psi' = \frac{2m}{\hbar^2} V(x)\psi - \frac{2m}{\hbar^2} E\psi$$

$$\Rightarrow \quad \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d}{dx}\psi'(x)\, dx = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{2m(-\beta)}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x)\psi(x)\, dx + 0$$

$$\Rightarrow \quad \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$\Rightarrow \quad -\kappa C - \kappa C = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} C$$

$$\Rightarrow \quad \kappa = m\beta/\hbar^2$$

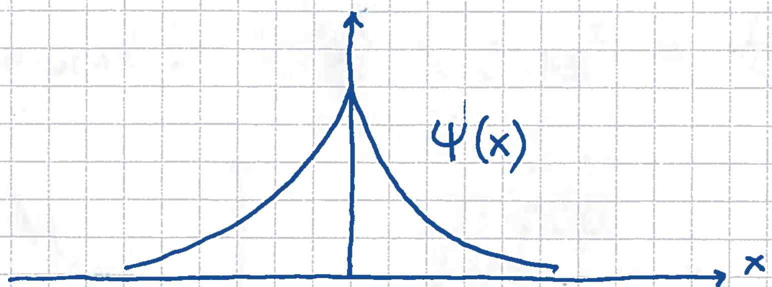
$$\Rightarrow \quad \frac{2mE}{\hbar^2} = -\varkappa^2 = -\frac{m^2\beta^2}{\hbar^4}$$

$$\Rightarrow \quad \underline{E = -\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}}$$

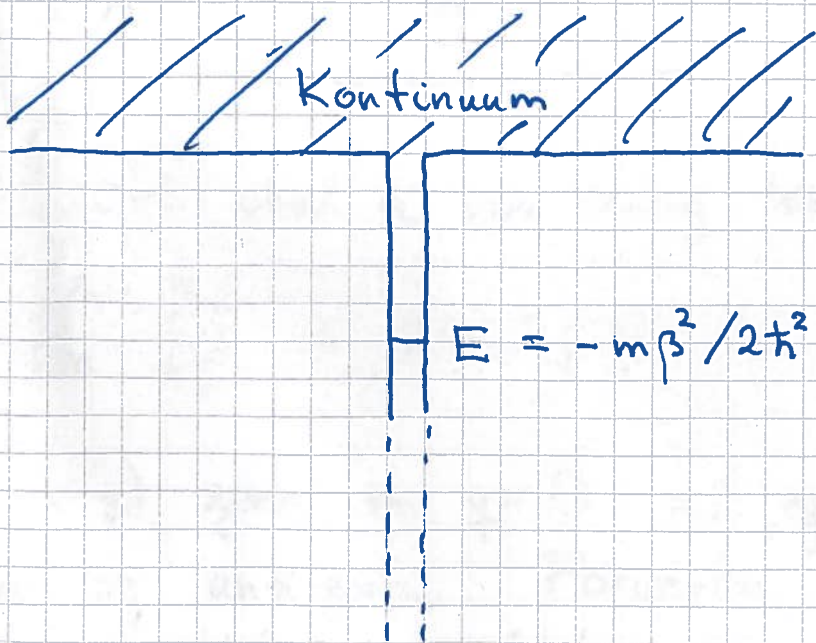
Dvs: En bundet tilstand i δ-brønn

Normering: $1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = |C|^2 \cdot 2\int_0^{\infty} e^{-2\varkappa x} dx = \frac{|C|^2}{\varkappa}$

$$\Rightarrow \psi(x) = \frac{\sqrt{m\beta}}{\hbar} e^{-m\beta|x|/\hbar^2}$$

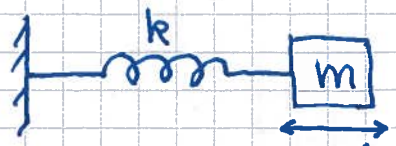


$E > 0$ tilsvarer kontinuerlig spektrum av ubundne tilst.



Harmonisk oscillator [PCH 3.5; DJG 2.3.2; IØ 3.4]

Klassisk:



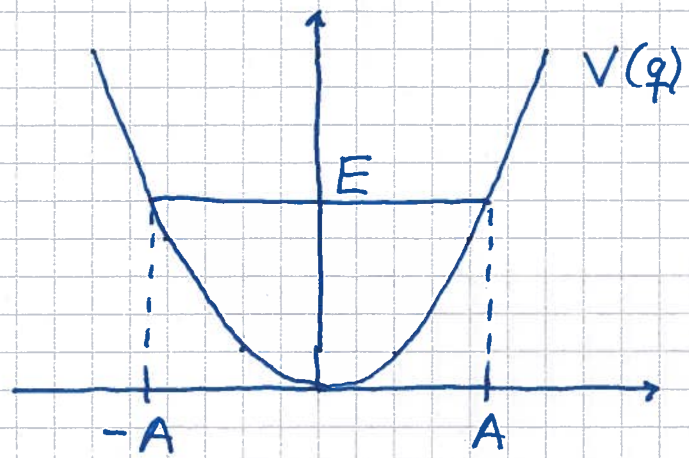
$q(t)$ = utsving fra likevekt

Hookes lov: $F(q) = -kq \overset{N2}{\Longrightarrow} \ddot{q} + \omega^2 q = 0 \;;\; \omega^2 = \frac{k}{m}$

Med f.eks. $q(0) = A$ og $\dot{q}(0) = 0$: $q(t) = A\cos\omega t$

$$E = K + V = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}kq^2 = \frac{1}{2}kA^2$$

Potensial: $V(q) = \frac{1}{2}kq^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$



Klassiske vendepunkter: $q = \pm A$

Med QM skal vi som vanlig løse TUSL:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \psi = E\psi$$

Med $V(q)$ symm. om $q = 0$ må egenfunk. $\psi(q)$ bli symm. og antisymm. Forventer symm. grunntilstand uten nullpunkter og vekselvis AS og S eksiterte tilstander med økende antall nullpunkter.